4.3 상태공간의 변환과 유니타리성
(Transformation of State Space and Unitarity)

우리는 3차원 벡터공간에서 좌표계를 변환하면 그에 따라 그 공간에 존재하는 벡터의 표현이 모두 바뀌는 것을 잘 알고 있다. 예컨대, 3차원 공간에서 좌표계를 회전시키면, 그에 따라 그 공간상에 존재하는 모든 벡터의 성분표현이 바뀐다. 그러나 이 경우 벡터의 성분들은 바뀌지만, 임의의 두 벡터의 내적은 보존된다는 것 또한 잘 알고 있다.
즉,

$$\overrightarrow{A} = A_x \hat{i} + A_y \hat{j} + A_z \hat{k} \;\Rightarrow\; \overrightarrow{A} = A_x{}' \hat{i} + A_y{}' \hat{j} + A_z{}' \hat{k}$$

$$\overrightarrow{B} = B_x \hat{i} + B_y \hat{j} + B_z \hat{k} \;\Rightarrow\; \overrightarrow{B} = B_x{}' \hat{i} + B_y{}' \hat{j} + B_z{}' \hat{k}$$

로 그 성분들은 바뀌지만, 아래와 같이 그 내적은 변하지 않는다.

$$\overrightarrow{A} \cdot \overrightarrow{B} = A_x \cdot B_x + A_y \cdot B_y + A_z \cdot B_z = A_x{}' \cdot B_x{}' + A_y{}' \cdot B_y{}' + A_z{}' \cdot B_z{}'$$

여기서 이러한 좌표계의 변환은 우리가 보는 관점의 변화를 의미한다고 볼 수 있을 것이다. 마찬가지로 주어진 물리적 계의 상태공간인 힐베르트 공간이 주어지면, 우리는 그 상태공간에 존재하는 임의의 상태를 기저상태(함수)들로 표현할 수 있다. 이는 마치 임의의 3차원 벡터를 $\hat{i}, \hat{j}, \hat{k}$ 라는 3개의 기저벡터들로 표현할 수 있는 것과 같다. 그런데, 3차원 공간에서 좌표계의 회전에 의한 것과 같이 이러한 상태공간의 기저상태들을 변환시킨다면 이들을 가지고 표현되는 상태함수들이나 그로부터 산출 가능한 특정 물리적 상태의 존재 확률은 어떻게 될까?

이에 대한 답을 얻기 위해서 우리는 3차원 벡터공간에서와 같이, 임의의 상태들이 기저상태들의 변환에 따라 어떻게 달라지는지 안 다음에, 임의의 두 상태벡터(함수)의 내적이 그러한 기저상태들의 변환에 따라 어떻게 변하는지 알아야 할 것이다. 일단 우리는 임의의 상태벡터(함수)가 기저상태(함수)들로 어떻게 표현되는지 이미 알고 있다. 디락의 브라-켓 표현을 쓰면, 임의의 상태 ψ 는 기저상태 ϕ_n 들로 다음과 같이 쓸 수 있다.

$$|\psi> = \sum_n |\phi_n><\phi_n|\psi> = \sum_n C_n |\phi_n> \;, \quad n = 1,2,3,\cdots \quad .$$

여기서 우리는 기저상태들의 완전성($\sum_n |\phi_n><\phi_n| = 1$)을 썼으며, $C_n = <\phi_n|\psi>$ 은 주어진 상태 ψ 의 기저상태 ϕ_n 에 대한 전개계수(expansion coefficient)이다. 즉, 3차원 벡터공간의 예에서 벡터의 성분(A_x, A_y 등)에 해당되는 양이다. 이제 3차원 공간에서의 회전과 같은 기저상태들을 변환시키는 연산자 U 를 가정하자. 즉, 연산자 U 에 의해서 기저상태들이 다음과 같이 변환되었다고 하자.

$$U|\phi_n> = |\xi_n> \;, \quad n = 1,2,3,\cdots \quad .$$

여기서 원래 기저함수들은 정규직교조건, $<\phi_n|\phi_m> = \delta_{nm}$ 을 만족한다고 가정한다. 그러면, 위와 같은 변환을 만족시키는 연산자 U 는 원래 기저함수들과 나중의 변환된 상태들로 다음과 같이 디락 브라-켓으로 표현할 수 있다.

$$U = \sum_n |\xi_n><\phi_n| \;, \quad n = 1,2,3,\cdots$$

이제 새로운 상태들을 정규직교화($<\xi_n|\xi_m> = \delta_{nm}$) 시켜, 새로운 기저상태들로 생각하면, 우리는 곧 다음의 관계식이 성립함을 알 수 있다.

$$U\,U^\dagger = (\sum_n |\xi_n><\phi_n|)(\sum_m |\phi_m><\xi_m| = \sum_{n,m} |\xi_n> \delta_{nm} <\xi_m| = \sum_n |\xi_n><\xi_n| = 1 \ ,$$

$$U^\dagger U = (\sum_m |\phi_m><\xi_m|)(\sum_n |\xi_n><\phi_n|) = \sum_{m,n} |\phi_m> \delta_{mn} <\phi_n| = \sum_m |\phi_m><\phi_m| = 1 \ .$$

이는 $U^\dagger = U^{-1}$ 임을 보여주며, 변환연산자 U 는 유니타리 연산자(unitary operator)임을 알 수 있다. 이제 이러한 변환연산자 U 에 의해서 다음과 같이 주어지는 임의의 두 상태벡터(함수)들, $|\psi> = \sum_n c_n |\phi_n>$, $|\zeta> = \sum_n d_n |\phi_n>$ 의 내적이 어떻게 변하는지 살펴보자.

먼저, 각 상태벡터들은 각각 다음과 같이 변환된다.

$$|\psi'> := U|\psi> = U(\sum_n c_n |\phi_n>) = \sum_n c_n U|\phi_n> = \sum_n c_n |\xi_n> \ ,$$

$$|\zeta'> := U|\zeta> = U(\sum_n d_n |\phi_n>) = \sum_n d_n U|\phi_n> = \sum_n d_n |\xi_n> \ .$$

그러므로 변환되기 전과 후의 두 상태벡터의 내적은 각각 다음과 같이 주어진다.

$$<\zeta|\psi> = (\sum_m d_m^* <\phi_m|)(\sum_n c_n |\phi_n>) = \sum_n d_n^* c_n \ ,$$

$$<\zeta'|\psi'> = (\sum_m d_m^* <\xi_m|)(\sum_n c_n |\xi_n>) = \sum_n d_n^* c_n \ .$$

즉, $<\zeta'|\psi'> = <\zeta|\psi>$ 이 되어 내적이 보존됨을 보여준다. 이는 3차원 벡터공간에서 좌표계를 회전시켰을 때에 두 벡터의 내적이 보존되는 것과 동일한 특성을 보여준다. 3차원 벡터공간에서 기저벡터들로 표시한 벡터의 성분들은 실수값으로 주어지므로 그 내적 역시 실수값으로 주어짐을 우리는 알고 있다. 한편 어떤 특정 벡터에 있어서 자신과의 내적은 그 벡터의 크기(길이)를 주므로, 내적이 보존된다 함은 벡터의 크기(길이)는 좌표계를 회전시키더라도 변하지 않음을 의미한다.

마찬가지로 힐베르트 공간에 존재하는 임의의 상태벡터들 사이의 내적은 상태벡터들을 기저상태들로 전개시켰을 때 그 전개계수들이 복소수 값을 가지므로 그 내적 역시 복소수 값을 가지며, 이 경우, 특정 상태에 대한 자기 자신과의 내적은 그 특정 상태가 존재할 확률이므로, 우리는 이러한 기저상태의 변환 하에서 주어진 상태의 존재 확률이 변하지 않고 보존됨을 알 수 있다. 이러한 유니타리성(unitarity)은 양자역학으로 기술되는 모든 계에서 우리가 주어진 물리계의 기술을 변환하더라도 그 존재 확률은 보존됨을 의미하는 양자역학의 매우 중요한 특성이며, 양자역학이 유효한 한 이 특성은 유지되어야 한다. 이러한 유니타리성은 1970년대 호킹의 블랙홀 복사이론의 출현에 의해 블랙홀 물리계에서 한참 동안 논란의 대상이 되었다. 하지만, 2000년대 이후 블랙홀 물리계에서도 유니타리성이 유지되는 것으로 이와 관련된 논란의 대부분이 정리되었다. (이에 대한 자세한 설명은 근래 출판된 L. Susskind의 "The Black Hole War"를 참조 바람.)
